

第 2 分野(インシリコ創薬)口頭発表
Selected Oral Presentations from 2nd Category (in silico drug discovery)

開催趣旨:

CBI 学会年会では、招待講演以外は基本的にポスター発表となっていますが、特に人だかりができていないようなポスターでは時間的・空間的制約から、なかなか発表者と話ができないという事態も起こっています。そこで発表者の許可が得られたポスターの中から、比較的若手の著者で特に興味深いと考えられるものを選択し、口頭発表して頂くことにしました。大勢の方に発表内容をご理解頂き、また議論して頂くために、広めの部屋を選択しております。当分野にご興味のある方は是非ご参加ください。

モデレーター: 広川 貴次 Takatsugu Hirokawa
産業技術総合研究所
National Institute of Advanced Industrial
Science and Technology

高岡 雄司 Yuji Takaoka
ダッソー・システムズ・バイオピア株式会社
Dassault Systèmes BIOVIA

多田 幸雄 Yukio Tada
東京工業大学
Tokyo Institute of Technology

福澤 薫 Kaori Fukuzawa
日本大学松戸歯学部
Nihon University

**1. 化合物・タンパク質間インターラクトーム情報とオミックスデータに基づくドラッグ
リポジショニング**

Target-based Drug Repositioning Using Large-scale Chemical-protein Interactome Data**澤田 隆介 Ryusuke Sawada**

九州大学生体防御医学研究所 Medical Institute of Bioregulation, Kyushu University

本研究では、薬物に関するケミカル情報や薬理作用情報、インターラクトーム情報、疾患に関するフェノタイプ情報などのオミックスデータを融合解析し、ドラッグリポジショニングを行うためのインシリコ手法を開発した。薬物の潜在的な標的タンパク質をオフターゲットを含めて大規模予測し、それを介して薬物を疾患に結びつける点が特長である。実際に日欧米の全ての既存薬に適用し、様々な疾患に対する既存薬の新規効能を大規模予測した。

2. GPCR と脂質リガンドの結合モデルに基づくリガンドの構造展開

Ligand-Guided Approach to Validate Computational Hydrophobic Binding Pocket Models of Lipid GPCRs**佐山 美紗 Misa Sayama**

東京大学大学院薬学系研究科 Graduate School of Pharmaceutical Sciences, The University of Tokyo

近年デオファナイズされた、脂質をリガンドとする GPCR に関して、その合成アゴニストとの結合モデルの構築、構造活性相関の考察、モデルに基づくアゴニストの構造展開を行った。その結果を報告し、脂質リガンドの GPCR への結合様式に関して考察する。

3. インフルエンザウイルス HA 亜型間交差反応性抗体の抗原認識機構の計算科学解析
Computational analysis of a conformational epitope of a broadly neutralizing antibody in influenza A virus hemagglutinin

五十嵐 学 Manabu Igarashi

北海道大学人獣共通感染リサーチセンター Hokkaido University Research Center for Zoonosis Control

インフルエンザウイルスの粒子表面にある糖蛋白質ヘマグルチニン (HA) は、抗原性の違いにより 16 種類の亜型に分類される。我々はこれまで、複数の HA 亜型のウイルスに対して中和活性を示すモノクローナル抗体 S139/1 の作出に成功した。このような亜型間交差反応を示す抗体は抗体医薬として、またそのエピトープはワクチン抗原や薬剤等の医薬品設計の標的として応用できる可能性がある。本研究では、計算科学手法を用いて S139/1 の分子認識機構を詳細に解析した。